

PR-111

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭПР-СПЕКТРОСКОПИИ И РАСЧЕТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ ПРОИЗВОДНЫХ НАФТОКСАЗОЛИЛ-1-СУЛЬФОКИСЛОТЫ

**А. Н. Цмокалюк¹, Н. В. Словеснова^{1,3}, И. С. Ковалев^{1,2}, А. Ю. Петров³,
Г. В. Зырянов^{1,2}**

¹Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19;

²Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620990, Россия,
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской /Академическая, 20/22;

³Уральский государственный медицинский университет Минздрава России, г. Екатеринбург,
620028, Россия, ул. Репина, 3.

E-mail: atsmok@mail.ru

Флуоресцентные соединения – перспективные фотодинамические агенты для создания новых биологически активных соединений фотодинамической терапии, сочетания неактивного и нетоксичного вещества и воздействия света, придающего соединению селективную токсичность¹. На рисунке 1 представлена структурная схема изученного соединения.

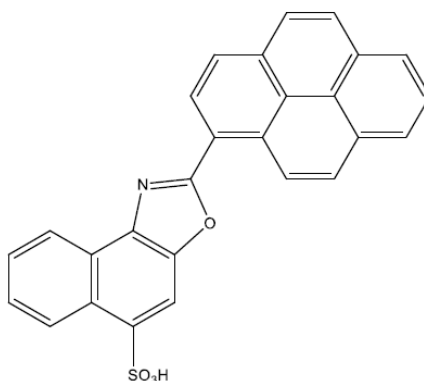


Рисунок 5 – Структурная формула изученного вещества.

Для моделирования спектров поглощения были проведены квантово-химические расчеты методом теории функционала плотности методом B3LYP в базисном наборе def2-TZVP. Рассчитано энергетическое положение трех низших свободных и трех высших занятых МО. Экспериментально зарегистрированные максимумы линий поглощения соответствуют переходам ВЗМО и на следующую за НСМО и переходу с ВЗМО-2 на НСМО+1. Необходимо отметить, что электронная плотность на ВЗМО находится преимущественно на сульфогруппе, в то время как НСМО и НСМО+1 преимущественно локализована на атомах пиренового радикала.

Для обнаружения возникновения парамагнитных центров при облучении УФ-светом вещества использовался спиновый зонд. Была показана линейная регрессия между временем облучения соединения и количеством образующихся парамагнитных центров с коэффициентом аппроксимации 0,997. Также на ЭПР-спектрометре был зарегистрирован аддукт ловушки ДМРО и радикала, возникающего при облучении. Структура ЭПР спектра аддукта свидетельствует о наличии в смеси ДМРО-ОН аддукта, что указывает на появление гидроксид-радикалов при облучении исследуемого вещества ультрафиолетом.

Библиографический список

1. Donnelly R. F., McCarron P. A., Tunney M. M. Antifungal photodynamic therapy // Microbiol. Res. 2008. Vol. 163, № 1. P. 1–12.